

磁気異方性効果の研究 (第2報) —ベンゼン環近傍に於ける誘導磁場分布の再計算と検討—

高橋 一朗*

Studies on the Diamagnetic Effects. Part 2. — Recalculation and Examination of the Induced Magnetic Field Distribution Patterns Nearby a Benzene Ring —

Ichiro TAKAHASHI

(Received Aug. 27, 1996)

Our new approximate calculation technique in the complete elliptic integrals is applied to the induced magnetic field distribution patterns nearby a benzene ring, based on the Johnson-Bovey equation. Comparisons with past similar calculations are also discussed.

1. 緒言

本論文では、前論文で述べた完全楕円積分 E 及び K の近似計算の新方法 (1) により、後に予定している本題の研究へ進んで良いかどうかの具体的検討として、ベンゼン環近傍に於ける誘導磁場分布の Johnson-Bovey 式による近似計算を行い、更に既存の計算結果と比較考察した結果を報告する。

Johnson-Bovey による近似式 (2) で得られた結果は、通常グラフの形で利用されているが、長年に亘って信頼され、権威がある。比較考察したのは、Johnson-Bovey による結果 (2) 及び中川による結果 (3) である。

2. 結果と考察

Johnson-Bovey 式は、誘導磁場に基づく化学シフト変化値 (プロトン NMR) を半定量的に求める目的で長らく用いられており、式 [1] により定義される (2)。

*生物化学工学科

$$\begin{aligned}\delta' \times 10^{-6} &= H'_{\text{eff}}/H_0 \\ &= \frac{ne^2}{6\pi mc^2 a} \cdot \frac{1}{[(1+\rho)^2 + z^2]^{1/2}} \cdot \left[K + \frac{1-\rho^2-z^2}{(1-\rho)^2+z^2} E \right] \quad [1]\end{aligned}$$

磁場の中に置かれたベンゼン環には「環電流」が生じ、これが更に誘導磁場を生起するので、誘導磁場の分布はベンゼン環の中心を通る垂線に対して回転対称となる。従って、記述する座標として円筒座標が用いられている（通常は、円筒座標でも $x y z$ 座標と同様に3つのパラメーターが必要であるが、この場合は、角度依存性が無いので2つのパラメーター ρ と z のみで記述出来るメリットがある）。なお、 a はベンゼン環の半径であり、 ρ と z はこれを単位として表されている。その他は、 n が電子数（この場合は6）、 e が電気素量、 m が電子質量、 c が光速を表す。また、 K 及び E は完全楕円積分で、 $0 \leq k^2 \leq 1$ なる定数 k^2 を含み、式 [2]・[3] のように定義される (4)。なお、式 [2]・[3] の積分区間には母関数の分母がゼロになる点 ($t=1$) が含まれているが、完全楕円積分 K で $k^2=1$ の時を除き定積分が存在する。

$$K(k) = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} dt \quad [2]$$

$$E(k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1-k^2t^2}{1-t^2}} dt \quad [3]$$

定数 k^2 は式 [4] で定義される ρ と z の関数である。

$$k^2 = \frac{4\rho}{(1+\rho)^2 + z^2} \quad [4]$$

なお、最初は、式 [1] の簡化式 [5] を用いて行ったのであるが、計算値が常にプラス（常磁性）になってしまい、式自身に間違いがあることが明らかとなった (5) ので、式 [1] をそのまま用いて計算を行うこととし、前報で報告した完全楕円積分の近似計算法（誤差は 10^{-5} 以下）を組み入れて、プログラムを組むことにした。

$$\Delta\sigma = H'/H \propto \int_0^\pi \frac{[(\rho \cos\theta - a)^2 + z^2]^{1/2} d\theta}{(\rho^2 + z^2 + a^2 - 2\rho a \cos\theta)^{3/2}} \quad [5]$$

プログラム (J B 1 6 0 0) は、VIP-BASIC (Mainstay 社製, ver. 1.0.3) を使用して作成した (Appendix 1)。演算は、PowerPC 8100/80AV (Macintosh 社製) を用いて行った。現段階での演算時間は、シンプソン法での区間分割数 N の最大が 1 6 0 0 の場合約 1 0 秒、1 6 0 0 0 の場合（定数 k^2 が 0.9 以上の時には自動的に切り替わる）約 1 0 0

秒を要している。Dimension の制約があり、これを極力、区間分割数 N のために確保する必要から、サブルーチン使用等によりプログラムを見易く整理することは行っていない。なお、プログラム中使用した物理恒数 (6) は次の通りである：

$$a = 1.40 \times 10^{-8} \text{ (cm)} ; \quad e = 4.774 \times 10^{-10} \text{ (cgs)} ; \\ m = 9.10953 \times 10^{-28} \text{ (g)} ; \quad c = 2.99792 \times 10^{10} \text{ (cm)} .$$

計算は、 $0.0 \leq \rho \leq 6.0$, $0.0 \leq z \leq 4.5$ の範囲で 0.1 刻みに、全ての点について行った。但し、発散点の近傍 ($0.95 \leq \rho \leq 1.05$, $0.0 \leq z \leq 0.1$) のみ、分布の特徴を正確に捉える目的で、 0.025 刻みとした。

計算結果を見易く表示するため、DeltaGraph Pro 3 (日本ポラロイド社製) を用いて ρ - z 平面上での等高線 (等遮蔽線) グラフを作成した。DeltaGraph は、現時点で唯一、等高線図を容易に作成出来るソフトウェアであるが、等間隔の数値でしか等高線が表示出来ない。そこで、等高線自体の間隔をほぼ同程度にして見易くするため、数値を変更して何通りか出力を行い、適宜繋ぎ合わせた。なお、太線と太線の間の、数値表示の無い細線は、これらの丁度中間値に当たる。なお、座標原点 ($\rho = z = 0$) はベンゼン環の中心、発散点 ($\rho = 1$, $z = 0$) はベンゼン環の縁に相当する。

以上のようにして得られたグラフを Fig. 1 に示した。また、比較考察を行うため、Johnson-Bovey 及び中川により報告された、ベンゼン環近傍に於ける等遮蔽線グラフを各々、Fig. 2 及び Fig. 3 として示した (共立出版の許可を得て ref. 3 から転載)。なお、等遮蔽線の数字は p pm 単位である。

筆者の結果は、同じ計算式を用いた Johnson-Bovey の結果にかなり良く合っているが、特異点 ($\rho = 1$, $z = 0$) の周辺は明らかに異なっている。式 [1] から、ここが発散点となることは明らかなので、或いは何か実測データに基づいて修正されたのかも知れないが、論文にはそのような記載は無く、かつ、40 年近く昔の論文でもあり、現時点では確かめようがない。但し、Johnson-Bovey が用いたコンピューター近似法 (7) で誤差が出て、ここが偶々発散にならなかったという可能性もある。

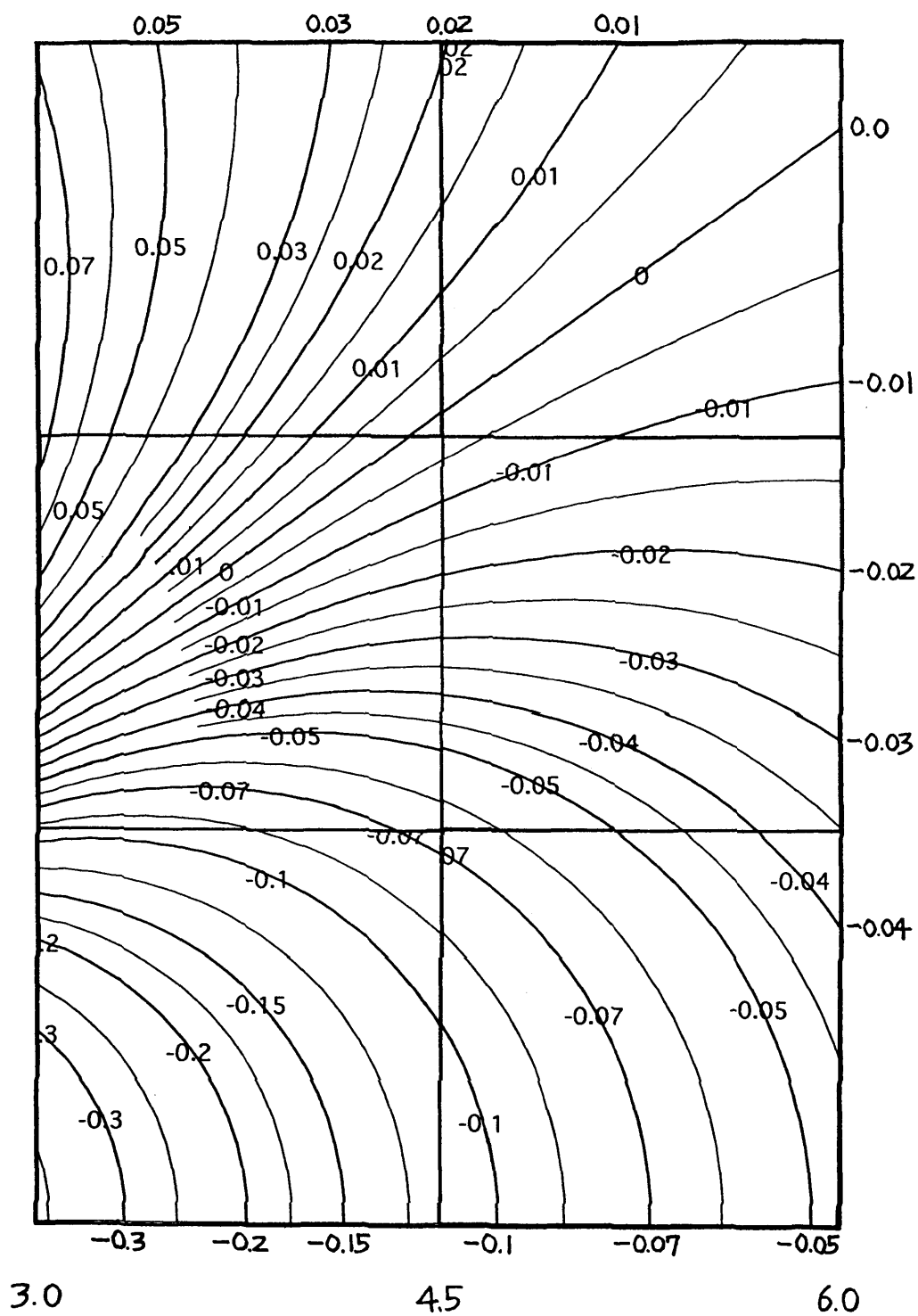
一方、別の方法に拠った中川の結果とも、かなり良く合っている。実測データに基づきパラメーターを計算に先立って修正しており、Johnson-Bovey のものより定量的な計算結果に近いと考えられるが、30 年前の国際学会要旨であり、かつ、関連資料は全て散逸したという回答を原著者から得た。従って、細かく比較考察することは出来なかったが、筆者の得たベンゼン環のすぐ近傍のパターンが、既存の 2 つの計算結果と (前者ではかなり、後者では多少) 異なることが認められる。幸いなことに、筆者の最終目的、即ち、ホスト・ゲスト錯体の形を計算する場合に用いる空間座標は、ベンゼン環から或る程度離れた位置のものだけであるから、その限りでは、筆者の計算法を用いて今後の検討を進めても問題は無いと判定した。

今後は、実際に磁気異方性効果が現れる化合物に応用し、定量的な議論を行い得るかどうかについて吟味して行きたいと考えている。

昔の資料の有無をチェックして頂いた中川直哉先生に感謝します。



Fig. 1. Ring current-based shield patterns nearby a benzene ring. Results by Takahashi.



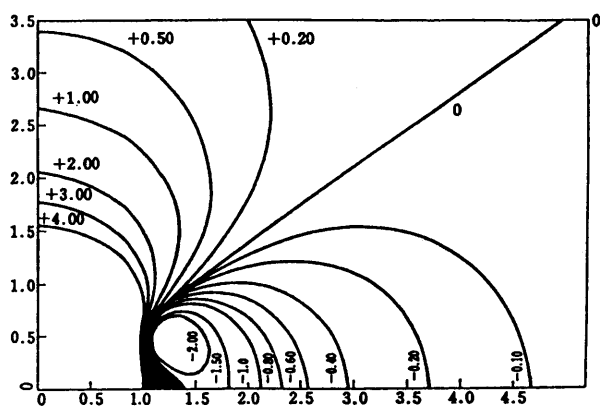


Fig. 2. Results by Johnson and Bovey.^{2,3,5}

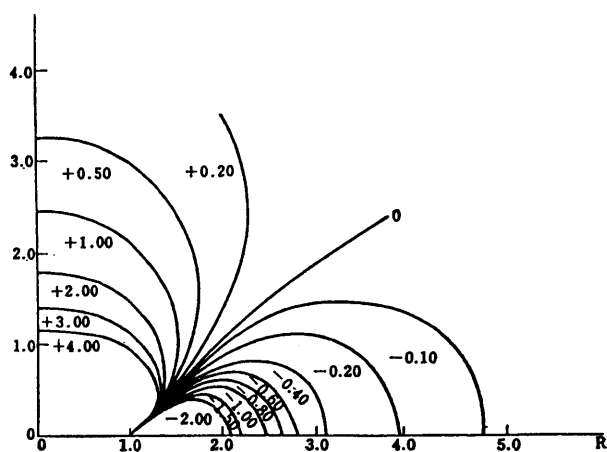


Fig. 3. Results by Nakagawa.³

References and Notes

- (1) 高橋一朗, 福井大学工学部研究報告, **43**, 241-252 (1995)。
- (2) C. E. Johnson, Jr. and F. A. Bovey, *J. Chem. Phys.*, **29**, 1012-1014 (1958).
- (3) 中川直哉, 「NMRスペクトルの解釈」, 共立出版, 1967年, p. 55。
- (4) 日本数学会編, 「岩波 数学辞典 第2版」, 岩波書店, 1968年, p. 77-78, 及び, p. 928。
- (5) 大木道則, 岩村 秀, 西田利昭, 「NMRスペクトル演習」, 南江堂, 1968年, p. 4。
- (6) 東京天文台編纂, 「理科年表」, 丸善, 1988年。
- (7) W. Bartky, *Reviews of Modern Physics*, **10**, 264-269 (1938)。

Appendix (JB1600)

```

CALL _dispatch_setup
*****
**
**   DIAMAGNETIC EFFECTS ACCORDING TO THE JOHNSON-BOVEY EQUATION   *
**
*****

N1=1600
N2=800
N3=400
N4=200
N5=100

INPUT 'VALUE IN AXIS RHO =';R
INPUT 'VALUE IN AXIS ZEE =';Z
K2=4.0*R/((1.0+R)^2.0+Z^2.0)

IF K2<=0.9 THEN
  N1=N1
  N2=N2
  N3=N3
  N4=N4
  N5=N5
  GOTO 1
ELSE
  N1=10*N1
  N2=10*N2
  N3=10*N3
  N4=10*N4
  N5=10*N5
1  T1=2*N1
  T2=2*N2
  T3=2*N3
  T4=2*N4
  T5=2*N5

  DIM KK(T1+1), EK(T1+1)

  FOR L=1 TO T1
    C2=SQR(1.0-((L-1)/T1)^2.0)
    M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T1)^2.0)
    KK(L)=1.0/(C2*M2)
    EK(L)=M2/C2
  NEXT L
  SKK0=KK(1)
  SKK1=0.0
  SEK0=EK(1)
  SEK1=0.0
  FOR M=1 TO N1
    SKK1=SKK1+KK(M*2)
    SEK1=SEK1+EK(M*2)
  NEXT M
  SKK2=0.0
  SEK2=0.0
  FOR M=1 TO N1-1
    SKK2=SKK2+KK(M*2+1)
    SEK2=SEK2+EK(M*2+1)
  NEXT M
  DDK1=(SKK0+SKK1*4.0+SKK2*2.0)/(T1*3.0)
  DDEK1=((SEK0+SEK1*4.0+SEK2*2.0)/(T1*3.0))*(1.0-R^2.0-Z^2.0)/((1.0-R)^2.0+Z^2.0)
  DD1=DDK1+DDEK1

  FOR L=1 TO T2
    C2=SQR(1.0-((L-1)/T2)^2.0)
    M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T2)^2.0)
    KK(L)=1.0/(C2*M2)
    EK(L)=M2/C2
  NEXT L
  SKK0=KK(1)
  SKK1=0.0
  SEK0=EK(1)
  SEK1=0.0
  FOR M=1 TO N2
    SKK1=SKK1+KK(M*2)
    SEK1=SEK1+EK(M*2)
  NEXT M
  SKK2=0.0
  SEK2=0.0
  FOR M=1 TO N2-1
    SKK2=SKK2+KK(M*2+1)
    SEK2=SEK2+EK(M*2+1)
  NEXT M
  DDK2=(SKK0+SKK1*4.0+SKK2*2.0)/(T2*3.0)
  DDEK2=((SEK0+SEK1*4.0+SEK2*2.0)/(T2*3.0))*(1.0-R^2.0-Z^2.0)/((1.0-R)^2.0+Z^2.0)
  DD2=DDK2+DDEK2

```

```

FOR L=1 TO T3
  C2=SQR(1.0-((L-1)/T3)^2.0)
  M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T3)^2.0)
  KK(L)=1.0/(C2*M2)
  EK(L)=M2/C2
NEXT L
SKK0=KK(1)
SKK1=0.0
SEK0=EK(1)
SEK1=0.0
FOR M=1 TO N3
  SKK1=SKK1+KK(M^2)
  SEK1=SEK1+EK(M^2)
NEXT M
SKK2=0.0
SEK2=0.0
FOR M=1 TO N3-1
  SKK2=SKK2+KK(M^2+1)
  SEK2=SEK2+EK(M^2+1)
NEXT M
DDKK3=(SKK0+SKK1*4.0+SKK2*2.0)/(T3^3.0)
DDEK3=((SEK0+SEK1*4.0+SEK2*2.0)/(T3^3.0))*(1.0-R^2.0-Z^2.0)/((1.0-R)^2.0+Z^2.0)
DD3=DDKK3+DDEK3

FOR L=1 TO T4
  C2=SQR(1.0-((L-1)/T4)^2.0)
  M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T4)^2.0)
  KK(L)=1.0/(C2*M2)
  EK(L)=M2/C2
NEXT L
SKK0=KK(1)
SKK1=0.0
SEK0=EK(1)
SEK1=0.0
FOR M=1 TO N4
  SKK1=SKK1+KK(M^2)
  SEK1=SEK1+EK(M^2)
NEXT M
SKK2=0.0
SEK2=0.0
FOR M=1 TO N4-1
  SKK2=SKK2+KK(M^2+1)
  SEK2=SEK2+EK(M^2+1)
NEXT M
DDKK4=(SKK0+SKK1*4.0+SKK2*2.0)/(T4^3.0)
DDEK4=((SEK0+SEK1*4.0+SEK2*2.0)/(T4^3.0))*(1.0-R^2.0-Z^2.0)/((1.0-R)^2.0+Z^2.0)
DD4=DDKK4+DDEK4

FOR L=1 TO T5
  C2=SQR(1.0-((L-1)/T5)^2.0)
  M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T5)^2.0)
  KK(L)=1.0/(C2*M2)
  EK(L)=M2/C2
NEXT L
SKK0=KK(1)
SKK1=0.0
SEK0=EK(1)
SEK1=0.0
FOR M=1 TO N5
  SKK1=SKK1+KK(M^2)
  SEK1=SEK1+EK(M^2)
NEXT M
SKK2=0.0
SEK2=0.0
FOR M=1 TO N5-1
  SKK2=SKK2+KK(M^2+1)
  SEK2=SEK2+EK(M^2+1)
NEXT M
DDKK5=(SKK0+SKK1*4.0+SKK2*2.0)/(T5^3.0)
DDEK5=((SEK0+SEK1*4.0+SEK2*2.0)/(T5^3.0))*(1.0-R^2.0-Z^2.0)/((1.0-R)^2.0+Z^2.0)
DD5=DDKK5+DDEK5

A=6.0*(4.774E-10)^2.0*(1.0E+06)
B=6.0*3.14159*(9.10953E-28)*(2.99792E+10)^2.0*(1.40E-08)
C=SQR((1.0+R)^2.0+Z^2.0)
DDMAX1=DD1*A/(B*C)
DDMAX2=DD2*A/(B*C)
DDMAX3=DD3*A/(B*C)
DDMAX4=DD4*A/(B*C)
DDMAX5=DD5*A/(B*C)

DDMAXZ1=1.0/((1.0/(DDMAX1-DDMAX2))-((1.0/(DDMAX2-DDMAX3)))+(DDMAX2
DDMAXZ2=1.0/((1.0/(DDMAX2-DDMAX3))-((1.0/(DDMAX3-DDMAX4)))+(DDMAX3
DDMAXZ3=1.0/((1.0/(DDMAX3-DDMAX4))-((1.0/(DDMAX4-DDMAX5)))+(DDMAX4
DDMAXZ4=1.0/((1.0/(DDMAX4-DDMAX5))-((1.0/(DDMAX5-DDMAX6)))+(DDMAX5
DDMAXZ5=1.0/((1.0/(DDMAX5-DDMAX6))-((1.0/(DDMAX6-DDMAX7)))+(DDMAX6
DDMAXZ6=1.0/((1.0/(DDMAX6-DDMAX7))-((1.0/(DDMAX7-DDMAX8)))+(DDMAX7
DDMAXZ7=1.0/((1.0/(DDMAX7-DDMAX8))-((1.0/(DDMAX8-DDMAX9)))+(DDMAX8
DDMAXZ8=1.0/((1.0/(DDMAX8-DDMAX9))-((1.0/(DDMAX9-DDMAX10)))+(DDMAX9
DDMAXZ9=1.0/((1.0/(DDMAX9-DDMAX10))-((1.0/(DDMAX10-DDMAX11)))+(DDMAX10
DDMAXZ10=1.0/((1.0/(DDMAX10-DDMAX11))-((1.0/(DDMAX11-DDMAX12)))+(DDMAX11
DDMAXZ11=1.0/((1.0/(DDMAX11-DDMAX12))-((1.0/(DDMAX12-DDMAX13)))+(DDMAX12
DDMAXZ12=1.0/((1.0/(DDMAX12-DDMAX13))-((1.0/(DDMAX13-DDMAX14)))+(DDMAX13
DDMAXZ13=1.0/((1.0/(DDMAX13-DDMAX14))-((1.0/(DDMAX14-DDMAX15)))+(DDMAX14
DDMAXZ14=1.0/((1.0/(DDMAX14-DDMAX15))-((1.0/(DDMAX15-DDMAX16)))+(DDMAX15
DDMAXZ15=1.0/((1.0/(DDMAX15-DDMAX16))-((1.0/(DDMAX16-DDMAX17)))+(DDMAX16
DDMAXZ16=1.0/((1.0/(DDMAX16-DDMAX17))-((1.0/(DDMAX17-DDMAX18)))+(DDMAX17
DDMAXZ17=1.0/((1.0/(DDMAX17-DDMAX18))-((1.0/(DDMAX18-DDMAX19)))+(DDMAX18
DDMAXZ18=1.0/((1.0/(DDMAX18-DDMAX19))-((1.0/(DDMAX19-DDMAX20)))+(DDMAX19
DDMAXZ19=1.0/((1.0/(DDMAX19-DDMAX20))-((1.0/(DDMAX20-DDMAX21)))+(DDMAX20
DDMAXZ20=1.0/((1.0/(DDMAX20-DDMAX21))-((1.0/(DDMAX21-DDMAX22)))+(DDMAX21
DDMAXZ21=1.0/((1.0/(DDMAX21-DDMAX22))-((1.0/(DDMAX22-DDMAX23)))+(DDMAX22
DDMAXZ22=1.0/((1.0/(DDMAX22-DDMAX23))-((1.0/(DDMAX23-DDMAX24)))+(DDMAX23
DDMAXZ23=1.0/((1.0/(DDMAX23-DDMAX24))-((1.0/(DDMAX24-DDMAX25)))+(DDMAX24
DDMAXZ24=1.0/((1.0/(DDMAX24-DDMAX25))-((1.0/(DDMAX25-DDMAX26)))+(DDMAX25
DDMAXZ25=1.0/((1.0/(DDMAX25-DDMAX26))-((1.0/(DDMAX26-DDMAX27)))+(DDMAX26
DDMAXZ26=1.0/((1.0/(DDMAX26-DDMAX27))-((1.0/(DDMAX27-DDMAX28)))+(DDMAX27
DDMAXZ27=1.0/((1.0/(DDMAX27-DDMAX28))-((1.0/(DDMAX28-DDMAX29)))+(DDMAX28
DDMAXZ28=1.0/((1.0/(DDMAX28-DDMAX29))-((1.0/(DDMAX29-DDMAX30)))+(DDMAX29
DDMAXZ29=1.0/((1.0/(DDMAX29-DDMAX30))-((1.0/(DDMAX30-DDMAX31)))+(DDMAX30
DDMAXZ30=1.0/((1.0/(DDMAX30-DDMAX31))-((1.0/(DDMAX31-DDMAX32)))+(DDMAX31
DDMAXZ31=1.0/((1.0/(DDMAX31-DDMAX32))-((1.0/(DDMAX32-DDMAX33)))+(DDMAX32
DDMAXZ32=1.0/((1.0/(DDMAX32-DDMAX33))-((1.0/(DDMAX33-DDMAX34)))+(DDMAX33
DDMAXZ33=1.0/((1.0/(DDMAX33-DDMAX34))-((1.0/(DDMAX34-DDMAX35)))+(DDMAX34
DDMAXZ34=1.0/((1.0/(DDMAX34-DDMAX35))-((1.0/(DDMAX35-DDMAX36)))+(DDMAX35
DDMAXZ35=1.0/((1.0/(DDMAX35-DDMAX36))-((1.0/(DDMAX36-DDMAX37)))+(DDMAX36
DDMAXZ36=1.0/((1.0/(DDMAX36-DDMAX37))-((1.0/(DDMAX37-DDMAX38)))+(DDMAX37
DDMAXZ37=1.0/((1.0/(DDMAX37-DDMAX38))-((1.0/(DDMAX38-DDMAX39)))+(DDMAX38
DDMAXZ38=1.0/((1.0/(DDMAX38-DDMAX39))-((1.0/(DDMAX39-DDMAX40)))+(DDMAX39
DDMAXZ39=1.0/((1.0/(DDMAX39-DDMAX40))-((1.0/(DDMAX40-DDMAX41)))+(DDMAX40
DDMAXZ40=1.0/((1.0/(DDMAX40-DDMAX41))-((1.0/(DDMAX41-DDMAX42)))+(DDMAX41
DDMAXZ41=1.0/((1.0/(DDMAX41-DDMAX42))-((1.0/(DDMAX42-DDMAX43)))+(DDMAX42
DDMAXZ42=1.0/((1.0/(DDMAX42-DDMAX43))-((1.0/(DDMAX43-DDMAX44)))+(DDMAX43
DDMAXZ43=1.0/((1.0/(DDMAX43-DDMAX44))-((1.0/(DDMAX44-DDMAX45)))+(DDMAX44
DDMAXZ44=1.0/((1.0/(DDMAX44-DDMAX45))-((1.0/(DDMAX45-DDMAX46)))+(DDMAX45
DDMAXZ45=1.0/((1.0/(DDMAX45-DDMAX46))-((1.0/(DDMAX46-DDMAX47)))+(DDMAX46
DDMAXZ46=1.0/((1.0/(DDMAX46-DDMAX47))-((1.0/(DDMAX47-DDMAX48)))+(DDMAX47
DDMAXZ47=1.0/((1.0/(DDMAX47-DDMAX48))-((1.0/(DDMAX48-DDMAX49)))+(DDMAX48
DDMAXZ48=1.0/((1.0/(DDMAX48-DDMAX49))-((1.0/(DDMAX49-DDMAX50)))+(DDMAX49
DDMAXZ49=1.0/((1.0/(DDMAX49-DDMAX50))-((1.0/(DDMAX50-DDMAX51)))+(DDMAX50
DDMAXZ50=1.0/((1.0/(DDMAX50-DDMAX51))-((1.0/(DDMAX51-DDMAX52)))+(DDMAX51
DDMAXZ51=1.0/((1.0/(DDMAX51-DDMAX52))-((1.0/(DDMAX52-DDMAX53)))+(DDMAX52
DDMAXZ52=1.0/((1.0/(DDMAX52-DDMAX53))-((1.0/(DDMAX53-DDMAX54)))+(DDMAX53
DDMAXZ53=1.0/((1.0/(DDMAX53-DDMAX54))-((1.0/(DDMAX54-DDMAX55)))+(DDMAX54
DDMAXZ54=1.0/((1.0/(DDMAX54-DDMAX55))-((1.0/(DDMAX55-DDMAX56)))+(DDMAX55
DDMAXZ55=1.0/((1.0/(DDMAX55-DDMAX56))-((1.0/(DDMAX56-DDMAX57)))+(DDMAX56
DDMAXZ56=1.0/((1.0/(DDMAX56-DDMAX57))-((1.0/(DDMAX57-DDMAX58)))+(DDMAX57
DDMAXZ57=1.0/((1.0/(DDMAX57-DDMAX58))-((1.0/(DDMAX58-DDMAX59)))+(DDMAX58
DDMAXZ58=1.0/((1.0/(DDMAX58-DDMAX59))-((1.0/(DDMAX59-DDMAX60)))+(DDMAX59
DDMAXZ59=1.0/((1.0/(DDMAX59-DDMAX60))-((1.0/(DDMAX60-DDMAX61)))+(DDMAX60
DDMAXZ60=1.0/((1.0/(DDMAX60-DDMAX61))-((1.0/(DDMAX61-DDMAX62)))+(DDMAX61
DDMAXZ61=1.0/((1.0/(DDMAX61-DDMAX62))-((1.0/(DDMAX62-DDMAX63)))+(DDMAX62
DDMAXZ62=1.0/((1.0/(DDMAX62-DDMAX63))-((1.0/(DDMAX63-DDMAX64)))+(DDMAX63
DDMAXZ63=1.0/((1.0/(DDMAX63-DDMAX64))-((1.0/(DDMAX64-DDMAX65)))+(DDMAX64
DDMAXZ64=1.0/((1.0/(DDMAX64-DDMAX65))-((1.0/(DDMAX65-DDMAX66)))+(DDMAX65
DDMAXZ65=1.0/((1.0/(DDMAX65-DDMAX66))-((1.0/(DDMAX66-DDMAX67)))+(DDMAX66
DDMAXZ66=1.0/((1.0/(DDMAX66-DDMAX67))-((1.0/(DDMAX67-DDMAX68)))+(DDMAX67
DDMAXZ67=1.0/((1.0/(DDMAX67-DDMAX68))-((1.0/(DDMAX68-DDMAX69)))+(DDMAX68
DDMAXZ68=1.0/((1.0/(DDMAX68-DDMAX69))-((1.0/(DDMAX69-DDMAX70)))+(DDMAX69
DDMAXZ69=1.0/((1.0/(DD
```